TITLE:

Large deviations and its application for a reaction-diffusion model (Probability Symposium)

AUTHOR(S):

角田, 謙吉

CITATION:

角田, 謙吉. Large deviations and its application for a reaction-diffusion model (Probability Symposium). 数理解析研究所講究録 2017, 2030: 122-127

ISSUE DATE:

2017-05

URL:

http://hdl.handle.net/2433/231881

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ KURENAI 紅 Kyoto University Research Information Repository

数理解析研究所講究録
第2030巻 2017年 122-127

Large deviations and its application for a reaction-diffusion model

角田 謙吉 *
(Kenkichi Tsunoda)
九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 †
(Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University)

1 序

本稿では反応拡散模型に対する “Macroscopic Fluctuation Theory”(以下 MFT と省略) について議論する. MFT とは Bertini らにより研究されている, 流体力学極限に対する大偏差原理に基づいた非平衡定常状態の数学的及び物理学的解析理論である. MFT の詳細については [1] 及び [1] 内の参考文献を参照して頂きたい. 先行研究では流体力学的方程式の定常解が一意的である場合に非常に深く解析が行われてきた. 一方反応拡散模型のように流体力学的方程式の定常解が一意的でない場合には, その数学的な結果は未解決とする問題が多く残っている. 本稿では MFT の理論の意味する所を紹介するとともに, 反応拡散模型に対する動的及び静的な大偏差原理, それらから得られる応用について紹介する. 本稿は Jonathan Farfan 氏と Claudio Landim 氏との共同研究 [8, 4] に基づく.

初めに反応拡散模型を紹介する. この模型に対する流体力学的方程式は次の反応拡散方程式

$$\partial_t\rho \;=\; \frac{1}{2}\Delta\rho+F(\rho)\;, \tag{1.1}$$

であり, [3] において反応拡散方程式 (1.1) を微視的な系より解析するために導入された. 正確な定義は以下で与えられる. N を自然数とし, $\mathbb{T}_N$ を離散周期トーラス $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ とする. 配置空間を $\{0,1\}^{\mathbb{T}_N}$ とし, その元を配置と呼び $\eta=\{\eta(x);x\in\mathbb{T}_N\}$ で表す. 反応拡散模型とは次の無限小生成作用素により定まる $\{0,1\}^{\mathbb{T}_N}$ 上の Markov 過程 $\eta_t^N=\{\eta_t^N(x);x\in\mathbb{T}_N\}$ である:

$$L_Nf(\eta)\;=\;\frac{N^2}{2}\sum_{x\in\mathbb{T}_N}[f(\eta^{x,x+1})-f(\eta)]+\sum_{x\in\mathbb{T}_N}c(\tau_x\eta)[f(\eta^x)-f(\eta)]\;, \tag{1.2}$$

ただし f は $\{0,1\}^{\mathbb{T}_N}$ 上の関数, c は $\{0,1\}^{\mathbb{Z}}$ 上の正値局所関数, $\eta^{x,x+1}$, $\tau_x\eta$, η^x はそれぞれ次で定義される配置である:

$$\eta^{x,y}(z)\;:=\;\begin{cases}\eta(y) & \text{if } z=x\;,\\ \eta(x) & \text{if } z=y\;,\\ \eta(z) & \text{otherwise}\;,\end{cases}\qquad \eta^x(z)\;:=\;\begin{cases}\eta(z) & \text{if } z\neq x\;,\\ 1-\eta(z) & \text{otherwise}\;,\end{cases}$$

* e-mail: k-tsunoda@imi.kyushu-u.ac.jp
† 〒819-0395, 福岡県福岡市西区元岡７４４番地

$$\tau_x\eta(y) \ := \ \eta(x+y) \ .$$

いくつか注意を述べる. (1.2) の右辺第一項は N^2 により時間についてスケール変換された排他過程に対応し, 第二項は粒子の出生及び死滅に対応する Glauber 力学である. また c が $\{0,1\}^{\mathbb{Z}}$ 上の正値局所関数であることから, 各 N に対して L_N により生成される Markov 過程は $\{0,1\}^{\mathbb{T}_N}$ 上既約になる. ゆえに $\{0,1\}^{\mathbb{T}_N}$ 上の確率測度であって, Markov 過程の時間発展に対して不変なものが一意に存在する. その確率測度を μ^N とする.

2 主結果

我々の興味は定常状態 μ^N の下で, 適当なスケール変換により決まる巨視的な粒子密度の振る舞いを決定することである. このことを正確に見るために, 配置 $\eta \in \{0,1\}^{\mathbb{T}_N}$ に対して, 1 次元連続トーラス $\mathbb{T}=\mathbb{R}/\mathbb{Z}$ 上の測度である経験分布 $\pi^N(\eta)$ を次で定義する:

$$\pi^N(\eta)(du) \ = \ \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbb{T}_N}\eta(x)\delta_{x/N}(du) \ ,$$

ただし δ_u は $u\in\mathbb{T}$ に集中する Dirac 測度である. $\mathcal{M}_+ = \mathcal{M}_+(\mathbb{T})$ を全測度 1 以下の $\mathbb{T}$ 上の Borel 測度全体の空間とすれば, μ^N は π^N により $\mathcal{M}_+$ 上に確率測度を誘導するので, それを $\mathcal{P}^N$ とする: $\mathcal{P}^N := \mu^N\circ(\pi^N)^{-1}$.

$0\le\rho\le1$ に対して ν_ρ を密度 ρ の $\{0,1\}^{\mathbb{Z}}$ 上の直積 Bernoulli 測度とし, $[0,1]$ 上の関数 B,D,F をそれぞれ次で定める:

$$B(\rho) \ = \ \int[1-\eta(0)]\,c(\eta)\,d\nu_\rho \ , D(\rho) \ = \ \int\eta(0)\,c(\eta)\,d\nu_\rho \ , F(\rho) \ = \ B(\rho)-D(\rho) \ .$$

Example 2.1. 飛躍率 c の例として Ising 相互作用に対する Glauber 力学に関するものを紹介する. 逆温度を β とし, $\gamma=\tanh\beta$ として飛躍率 c を次で定める:

$$c(\eta) \ = \ 1+2\gamma(1-2\eta(0))(\eta(-1)+\eta(1)-1)+\gamma^2(-1+2\eta(-1))(-1+2\eta(1)) \ .$$

このとき対応するポテンシャル $V=-\int F$(の一つ) は

$$V(\rho) \ = \ -(1-\gamma)^2(1-\rho)\rho+2\gamma^2(1-\rho)^2\rho^2 \ ,$$

と計算される. 簡単な計算から分かるように V は $\gamma<1/2$ のとき唯一の最小値をとり, $\gamma>1/2$ のとき双安定なポテンシャルとなる.

主結果を述べるためにいくつか仮定を紹介する. $[0,1]$ 上の関数 B と D は凹であるとし, $F=B-D$ はある $a,b>0$ を用いて次の三次関数であるとする:

$$F(\rho) \ = \ (b-a)(2\rho-1)-b(2\rho-1)^3 \ .$$

これらの仮定の下で次が成立する.

Theorem 2.1. $a\ge b$ のとき測度列 $\{\mathcal{P}^N; N\ge1\}$ は $(1/2)du$ に集中する Dirac 測度に $N\to\infty$ で収束し, $a<b$ のとき $(1\pm\sqrt{(b-a)/b})/2du$ に $N\to\infty$ で等確率で集中している. ここで du は $\mathbb{T}$ 上の Lebesgue 測度である.

Theorem 2.1 は [2] において予想されていた相転移の問題について本質的に答えを与えるものである．Theorem 2.1 の証明は測度列 $\{\mathcal{P}^N; N \geq 1\}$ に対して大偏差原理を証明し，そのレート関数の零点を決定することに基づいている．そのための最初のステップは，有限次元の場合に対応する Freidlin-Wentzell 型の大偏差原理を示すことにある．この模型に沿って言い換えると，[3] で示されている流体力学極限に対する大偏差原理を証明する必要がある．その一部は [6] において示されているが，我々の目的の為には不十分なものであるため，[6] の結果を改善する必要がある．関数 B と D に対する仮定はこのステップでのみ必要となる．次のステップは得られた動的な大偏差原理を用いて静的な大偏差原理，つまり $\{\mathcal{P}^N; N \geq 1\}$ に対する大偏差原理を証明することである．この目的のために有限次元の Freidlin-Wentzell 理論を，我々の無限次元の設定において展開する．最後に反応拡散方程式の定常解全体の集合の構造に関する [7] の結果や安定性に関する [5] の結果を援用することにより，静的な大偏差原理のレート関数の零点が決定され Theorem 2.1 が証明される．

3 動的な大偏差原理

本節では [8] で論じられている反応拡散模型に対する動的な大偏差原理について紹介する．

初めに経験分布過程 π_t^N を次で定義する:

$$\pi_t^N(du) \;=\; \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbb{T}_N}\eta_t^N(x)\delta_{x/N}(du)\,.$$

また T を正数とし，$D([0,T],\mathcal{M}_+)$ を Skorokhod 空間とする．ここで初期分布について明らかにする必要があるが，初期分布は決定的な配置 $\{\eta^N; N\geq 1\}$ から出発するものとし，ある関数 $\rho_0:\mathbb{T}\to[0,1]$ が存在して $\{\eta^N; N\geq 1\}$ は任意の $G\in C(\mathbb{T})$ に対し

$$\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbb{T}_N}G(\frac{x}{N})\eta^N(x) \;=\; \int_{\mathbb{T}}G(u)\rho_0(u)du\,,$$

が成立するとする．Q^N を経験分布過程 π^N により誘導される $D([0,T],\mathcal{M}_+)$ 上の確率測度とする．[6] と我々の設定の違いは初期分布についてのみである．我々の初期分布は決定的な配置より出発するものを考えているが，[6] では初期配置はランダムなものを考えていることに注意する．

$\{Q^N; N\geq 1\}$ に対する大偏差原理を述べるために，そのレート関数を定義しよう．$\mathcal{M}_{+,1}$ を $\mathcal{M}_+$ の部分集合 $\{\pi\in\mathcal{M}_+; \pi(du)=\gamma(u)du,\ 0\leq\gamma(u)\leq 1\ a.e.\}$ とする．$\pi(t,du)=\rho(t,u)du\in D([0,T],\mathcal{M}_{+,1})$ 及び試験関数 $G\in C^{1,2}([0,T]\times\mathbb{T})$ に対して $J_G(\pi)$ を

$$\begin{aligned}
J_G(\pi) \;=\;& \langle\pi_T,G_T\rangle-\langle\pi_0,G_0\rangle \\
&-\int_0^T dt\ \langle\pi_t,\partial_t G_t+\frac{1}{2}\Delta G_t\rangle-\frac{1}{2}\int_0^T dt\ \langle\chi(\rho_t),(\nabla G_t)^2\rangle \\
&-\int_0^T dt\ \Big\{\langle B(\rho_t),e^{G_t}-1\rangle+\langle D(\rho_t),e^{-G_t}-1\rangle\Big\}\,,
\end{aligned}$$

により定義する．但し $\chi(\alpha)=\alpha(1-\alpha)$ であり，$\langle\cdot,\cdot\rangle$ は測度と関数のカップリング及び $L^2(\mathbb{T})$ 上の内積を表すものとする．$D([0,T],\mathcal{M}_+)$ 上の関数 I_T 及び I_{ρ_0} をそれぞれ次で定義する．

$$I_T(\pi) \;=\; \begin{cases}\sup_{G\in C^{1,2}}J_G(\pi) & \text{if } \pi\in D([0,T],\mathcal{M}_+^1)\,,\\ \infty & \text{otherwise}\,,\end{cases}$$

$$I_{\rho_0}(\pi) \;=\; \begin{cases} 0 & \text{if } \pi(0,du) = \rho_0(u)du\;, \\ \infty & \text{otherwise}\;. \end{cases}$$

最後に動的な大偏差原理のレート関数を $I \equiv I_T(\pi|\rho_0) := I_{\rho_0}(\pi) + I_T(\pi)$ により定義する. 厳密にはあるエネルギー評価をレート関数の定義に含めるのだが, 詳細は [8, 4] に委ねることにする.

$\mathcal{A}$ により, ある $H \in C^{2,3}([0,T]\times\mathbb{T})$ に対して密度 ρ が偏微分方程式

$$\begin{cases} \partial_t\rho \;=\; (1/2)\Delta\rho - \nabla(\chi(\rho)\nabla H) + B(\rho)e^{H} - D(\rho)e^{-H}\;, \\ \rho(0,\cdot) \;=\; \rho_0(\cdot)\;, \end{cases}$$

の解であるもの全体の集合とする. [6] で行われている議論により, 次の部分的な大偏差原理は容易に証明される.

Theorem 3.1. $D([0,T],\mathcal{M}_+)$ における任意の閉集合 $\mathcal{C}$ 及び開集合 $\mathcal{O}$ に対して次が成立する.

$$\limsup_{N\to\infty} \frac{1}{N}\log Q^N[\mathcal{C}] \;\le\; -\inf_{\pi\in\mathcal{C}} I(\pi)\;,$$
$$\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{N}\log Q^N[\mathcal{O}] \;\ge\; -\inf_{\pi\in\mathcal{O}\cap\mathcal{A}} I(\pi)\;.$$

完全な大偏差原理を得るために下からの評価における下限中の $\mathcal{A}$ を取り除く必要があるが, それは次の補題により示される. 関数 B と D が凹である仮定は次の補題を示す段階のみで用いられることに注意する.

Lemma 3.2. $[0,1]$ 上の関数 B と D は凹である仮定する. このとき, $I(\pi) < \infty$ なる任意の $\pi \in D([0,T],\mathcal{M}_+)$ に対して, $D([0,T],\mathcal{M}_+)$ において π に収束する $\mathcal{A}$ 内の点列 $\{\pi_n; n\ge 1\}$ であって,

$$\lim_{n\to\infty} I(\pi_n) \;=\; I(\pi)\;,$$

となるものが存在する.

先に述べたように Theorem 3.1 と Lemma 3.2 により動的な大偏差原理を得る.

Theorem 3.3. $[0,1]$ 上の関数 B と D は凹である仮定する. このとき $D([0,T],\mathcal{M}_+)$ における任意の閉集合 $\mathcal{C}$ 及び開集合 $\mathcal{O}$ に対して次が成立する.

$$\limsup_{N\to\infty} \frac{1}{N}\log Q^N[\mathcal{C}] \;\le\; -\inf_{\pi\in\mathcal{C}} I(\pi)\;,$$
$$\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{N}\log Q^N[\mathcal{O}] \;\ge\; -\inf_{\pi\in\mathcal{O}} I(\pi)\;.$$

さらに関数 I は下半連続であり good である.

いくつか注意を述べる. Lemma 3.2 は流体力学極限に対する大偏差原理を証明する際, 様々な模型において技術的に工夫を必要とするステップである. 次に下半連続性はレート関数の定義に含まれていることが多いが, ここでは I の下半連続化を取る必要がないことを示した. この下半連続性は [6] において示すことが出来なかったものとして述べられている. I の下半連続性は静的な大偏差原理を示す際に非常に重要となる性質であり, 道の空間 $D([0,T],\mathcal{M}_+)$ における多くの点列に対してそのコンパクト性を与えるものとなっている.

4 静的な大偏差原理

本節では [4] で論じられている反応拡散模型に対する静的な大偏差原理について紹介する.

初めに反応拡散方程式の定常解全体の集合について次の仮定をおく. l 個の関数 $\bar{\rho}_1, \cdots, \bar{\rho}_l : \mathbb{T} \to [0,1]$ が存在して, 反応拡散方程式の定常解 $\bar{\rho}$ はある $1 \le i \le l$ とある $v \in \mathbb{T}$ により $\bar{\rho}(\cdot) = \bar{\rho}_i(\cdot - v)$ とかける.

$1 \le i \ne j \le l$ を固定する. $\mathcal{M}_+$ 上の関数 V_i を次で定義する:

$$V_i(\vartheta) \;=\; \inf\{I_T(\pi|\bar{\rho}_i); T > 0, \pi \in D([0,T], \mathcal{M}_+), \pi_T = \vartheta\} .$$

V_i は準ポテンシャルと呼ばれる量であり, 一般の非定常状態 $\vartheta \in \mathcal{M}_+$ を定常状態 $\bar{\rho}_i$ より生成するための最小コストと考えられる. また $\bar{\vartheta}_i(du) = \bar{\rho}_i(u)du$ とおき, $v_{ij} = V_i(\bar{\vartheta}_j)$ とする.

$\mathcal{T}(i)$ により根が i である重み付きであり向き付けられた $\{1, \cdots, l\}$ 上の全域木全体の集合とする. 各辺に対して向きは子孫から親に対して向きは入れ, 向き付きの辺 (j,k) に対して重みは v_{jk} が割り当てられているものとする. 各 $g \in \mathcal{T}(i)$ に対して, g 上の重みの総和を $\kappa(g)$ とし, $w_i = \min_{g \in \mathcal{T}(i)} \kappa(g)$ とおく. $w = \min_{1 \le i \le l} w_i$ とし, $\mathcal{M}_+$ 上の関数 W を

$$W(\vartheta) \;=\; \min_{1 \le i \le l} \Big\{ w_i - w + V_i(\vartheta) \Big\} ,$$

とおく. このとき定常状態 $\{\mathcal{P}^N; N \ge 1\}$ に対する大偏差原理は次の定理で与えられる.

Theorem 4.1. $[0,1]$ 上の関数 B と D は凹である仮定する. このとき M_+ における任意の閉集合 $\mathcal{C}$ 及び開集合 $\mathcal{O}$ に対して次が成立する.

$$\limsup_{N \to \infty} \frac{1}{N} \log \mathcal{P}^N[\mathcal{C}] \;\le\; -\inf_{\vartheta \in \mathcal{C}} W(\vartheta) ,$$
$$\liminf_{N \to \infty} \frac{1}{N} \log \mathcal{P}^N[\mathcal{O}] \;\ge\; -\inf_{\vartheta \in \mathcal{O}} W(\vartheta) .$$

さらに関数 W は下半連続であり good である.

5 結論

本稿では反応拡散模型に対する MFT について議論をし, 定常状態がある意味で相転移を起こすことを紹介した. この相転移現象を見るために定常状態に対する大偏差原理を示し, そのレート関数の零点を決定する必要がある. 証明の鍵となることは, Freidlin-Wentzell 理論を我々の無限次元の設定において展開することであり, そのために流体力学極限に対する大偏差原理を紹介した. 最後に関連する偏微分方程式に対するいくつかの結果を援用することにより, 相転移現象が証明される. 今後の展望として, 得られた大偏差原理のレート関数 W に対して, 明示的な表示を得ることが一つの問題として挙げられる. レート関数 W を解析することは, 定常状態の長距離性, Onsager-Machlup 関係, 反応拡散模型における準安定性の問題へ繋がると考えている.

参考文献

[1] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio and C. Landim: Macroscopic fluctuation theory. Rev. Modern Phys. **87**, 593–636 (2015).

[2] T. Bodineau and M. Lagouge: Current large deviations in a driven dissipative model. J. Stat. Phys. **139**, 201–218 (2010).

[3] A. De Masi, P. Ferrari and J. Lebowitz: Reaction diffusion equations for interacting particle systems. J. Stat. Phys. **44**, 589–644 (1986).

[4] J. Farfan, C. Landim and K. Tsunoda. Static large deviations for a reaction-diffusion model. submitted, available at arXiv:1606.07227.

[5] B. Fiedler, C. Rocha, M. Wolfrum: Heteroclinic orbits between rotating waves of semilinear parabolic equations on the circle. J. Differential Equations **201**, 99–138 (2004).

[6] G. Jona-Lasinio, C. Landim and M. E. Vares: Large deviations for a reaction diffusion model. Probab. Theory Related Fields **97**, 339–361 (1993).

[7] S. Kosugi, Y. Morita and S. Yotsutani: A complete bifurcation diagram of the Ginzburg-Landau equation with periodic boundary conditions. Comm. Pure Appl. Anal. **4**, 665–682 (2005).

[8] C. Landim and K. Tsunoda. Hydrostatics and large deviations for a reaction-diffusion model. to appear in Ann. Inst. H. Poincaré, available at arXiv:1508.07818.